無限粒子の力学系の構成 (I) (力学系の理論)

AUTHOR(S):

志賀, 徳造

数理解析研究所講究録
216巻 1974年 133-141

無限粒子の力学系の構成，I

奈良女子大，理，志賀徳造

§.1. 統計力学において，平衡状態をGibbs ensembleによって記述する方法は，非常に有効である。それは，分子運動のような多くの粒子からなる力学系の平衡状態（その力学系が，長時間経て，巨視的には変化の見られなくなった状態）を相空間上の確率測度として表現するもので，それからあらゆる物理量が計算される。今，pair-wise potential をもつ，N粒子系の運動を考えると，そのハミルトニアンは，

$$(1) \qquad H(q_1,p_1;\cdots;q_N,p_N)=\sum_{i=1}^{N}\frac{p_i^2}{2m}+\sum_{i<j}\Phi(q_i-q_j)$$

以后，一次元のみを取扱うので，$(q_i,p_i)\in R\times R$，$m=1$，Φ は even function とする。

今，$V=[a,b)\subset R$ を，aとbを同一視することにより，一次元トーラスと考え，Vの中にある有限個の粒子が(1)に従って運動する系を考えると，運動方程式は

$(q_1(t),p_1(t);\cdots;q_n(t),p_n(t))\in(V\times R)^n$ に対して

$$(2)\quad\begin{cases}\dfrac{dq_i}{dt}=p_i\\[2mm]\dfrac{dp_i}{dt}=\displaystyle\sum_{j=1,j\neq i}^{n}F(q_i-q_j)\qquad F(x)=-\Phi'(x)\end{cases}$$

$\mathfrak{X}(V) \equiv \sum_{n=0}^{\infty} (V \times R)^n \ni x = (q_i, p_i)_{i=1,\cdots,n}$; 区別された粒子系

$[\mathfrak{X}](V) \equiv \mathfrak{X}(V)/(\text{permutation})$; 区別されない粒子系の集合

今，$[\mathfrak{X}](V)$ 上の確率測度 $\rho_{(\beta, \mu, H; V)}$ を次のように定義する。

$$(3) \quad \rho_{(\beta, \mu, H; V)}(E) = \frac{1}{\Xi} \sum_{n=0}^{\infty} \int_{E \cap (V \times R)^n} \exp[\beta\mu n - \beta H(q_1, p_1; \cdots, q_n, p_n)] \frac{dq_1 \cdots dp_1 \cdots dp_n}{n!}$$

ここで，β は温度の逆数，μ は化学ポテンシャル，

Ξ は $\rho_{(\beta, \mu, H; V)}([\mathfrak{X}](V)) = 1$ となるように選ぶ。

(3)で定義された $\rho_{(\beta, \mu, H; V)}$ を (β, μ, H) に対する V 上の grand canonical Gibbs ensemble という。これが (2) に対する不変測度になることは容易にわかる。我々は非常に多くの粒子系を問題にするのであるが，それは $V \uparrow R$ に拡げることによって得られる。その時の $\rho_{(\beta, \mu, H; V)}$ の極限点を limiting Gibbs ensemble という。極限点は一般には唯一つではない。(その時，相転移が起っている。即ち2つ以上の平衡状態が存在する。)

そこで，我々の問題意識は，無限粒子の力学系を考えれば，粒子が非常に多くあることに帰因して，エルゴード仮説が成立つにちがいない，という点から出発している。即ち，たとえ，運動方程式 (2) から導かれる等エネルギー面上の flow が，エルゴード的でなくても，対応する無限系を考えればエルゴード的に運動していると予想されている。

その出発点として，まず，無限系に対応する力学系の構成からはじめる必要がある．

$$\mathcal{X} \equiv \left\{ \begin{array}{ll} x = (q_i, p_i)_{i=1,\cdots,n} & \\ \text{又は} & \\ x = (q_i, p_i)_{i\in \mathbb{N}} & ;\ \lim_{i\to\infty} |q_i| = +\infty \end{array} \right\} \quad \begin{array}{l}\text{ここで}\\ (q,p)\in R\times R\end{array}$$

$[\mathcal{X}] \equiv \mathcal{X}/(\text{permutation})$ ；局所有限な区別されない粒子系

無限系に対しては，一応，この $[\mathcal{X}]$ を相空間と考える。

この時，我々の問題は次のようになる。

Φ : pair-wise potential (given)

問題 I．無限系に対して，(2) に対応する力学系を構成すること。その際，$[\mathcal{X}]$ 全体の上では不可能なので，少なくとも limiting Gibbs ensemble で測って full measure になる適当な $[\mathcal{X}]$ の subspace $[\mathcal{X}_0]$ を見つける必要がある。

問題 II．I で構成した力学系が limiting Gibbs ensemble を不変にすること。

問題 III．エルゴード性，できれば mixing より強いエルゴード性の証明。

問題 IV．エントロピーが，この力学系の時間変化に対して，不変であること。

最終的には3次元空間のより現実的な potential に対して，これらの問題が解決されなければならない。然し1次元の場合にも解決には，まだまだ時間を要するだろう。

§.2. 既に知られていること。

$\boxed{\text{A}}$ 理想気体モデル.

$$R^{\nu} \ni x \qquad \Phi(x) = \begin{cases} 0 & x \neq 0 \\ +\infty & x = 0 \end{cases}$$

粒子を区別しなければ、質点の衝突は、速度を交換するだけだから、$\Phi \equiv 0$ と同じになり、この場合の力学系の構成は自明で、更に、K-flow になる (Sinai-Volkovyskii)。

しかし、実際は Bernoulli-flow になっている。

$\boxed{\text{B}}$ 一次元球モデル(無限個の1次元球(直径 $r_0>0$)が衝突のみによって運動する力学系)

$$\Phi(x) = \begin{cases} +\infty & |x| < r_0 \\ 0 & |x| \geq r_0 \end{cases}$$

その時の相空間は $[\mathcal{X}_{r_0}] \equiv \{ x = (q_i, p_i) \in [\mathcal{X}] \,;\, |q_i - q_j| \geq r_0 \ (i \neq j) \}$.

弾性壁をもつ場合; 理想気体モデルに flow として同型.

従って、Bernoulli flow (Pazzis)

R^1 全体の場合も、K-flow になることが Sinai により示された。(この内容は、II の講演で、村田氏により話されることになっている。)

$\boxed{\text{C}}$ 滑らかな potential の場合.

$\Phi(x)$: even function.

$F(x) \equiv -\Phi'(x)$ compact 台をもつ. Lipschitz conti. fun.

この時、(2) に対応する無限系を方程式は次のようになる。

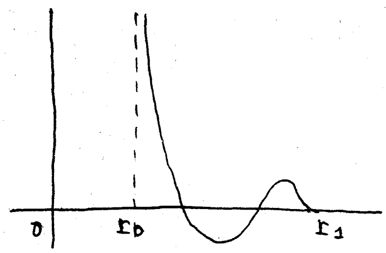
$$
(4) \quad \begin{cases} \dfrac{dq_i}{dt} = p_i \\[2mm] \dfrac{dp_i}{dt} = \displaystyle\sum_{j:j\neq i} F(q_i - q_j) \end{cases} \qquad i = 1, 2, \cdots, n, \cdots
$$

ここで、右辺の無限和は $x = (q_i, p_i) \in \mathfrak{X}$ ならば、F は compact 台をもつので、実際は有限和である。

このとき limiting Gibbs ensemble に対する full measure の subspace $[\mathfrak{X}_0] \subset [\mathfrak{X}]$ を見つけることができて、その上で、(4) を解くことができて、問題 I, II, IV は O.K. である。(Lanford).

$\boxed{D}$. 一般の Potential について

$$
\Phi(x) = \begin{cases} +\infty & |x| \leqq r_0 \\ \text{smooth} & r_0 < |x| \leqq r_1 \\ 0 & |x| > r_1 \end{cases}
$$



このような一般の Potential の場合にも Sinai は力学系を構成した。(参照:村田氏の講演.)

ここでは、特に、$\boxed{C}$ についての Lanford の結果を紹介する。

§3. なめらかな Potential の場合。

$V \subset R$ に対して $N_V(x) \equiv \#\{i \,;\, q_i \in V\}$ $\quad x = (q_i, p_i)$

$$
\mathfrak{X}_0 \equiv \left\{ x \in \mathfrak{X} \,;\, |x| \equiv \sup_i \frac{|p_i|}{\log_+(q_i)} \vee \sup \left\{ \frac{N_{(\alpha,\beta)}(x)}{\beta - \alpha} \,;\, \beta - \alpha > \log_+ \frac{\alpha+\beta}{2} \right\} \right.
$$

ここで　$\log_+(\alpha) \equiv \log(\alpha \vee e)$

定理 1.

$F(x)$; compact台をもつ Lipschitz conti. fun.

$\forall x = (q_i, p_i) \in \mathcal{X}_0$ に対して，次の 3 条件をみたす解は，唯一つ存在する。

$$(5)\begin{cases} ① \begin{cases} \dfrac{dq_i}{dt} = p_i \\ \dfrac{dp_i}{dt} = \displaystyle\sum_{j:j\neq i} F(q_i - q_j) \end{cases} & ② \ q_i(0) = q_i, \ p_i(0) = p_i \\ ③ \ |x(t)| : \text{局所有界（}t\text{に関して）} \end{cases}$$

定理 1 によって，$\mathcal{X}_0$ 及び $[\mathcal{X}_0]$ 上に 1 径数変換群 $\{T_t\}_{-\infty<t<\infty}$ が定義できる。

定理 1 の証明の概略

$x \in \mathcal{X}$ に対して Banach space $\mathcal{Y}_x$ を対応させる。

i.e. $x = (q_i, p_i)$ とすると，

$$\mathcal{Y}_x \equiv \left\{ \zeta = (\xi_i, \eta_i) \ ; \ \|\zeta\|_x \equiv \sup_i \frac{|\xi_i| \vee |\eta_i|}{\log_+(q_i)} < +\infty \right\}$$

1°, $x \in \mathcal{X}_0$, $\forall d > 0$ (fix), $\exists B > 0$ such that $\|\zeta\|_x \leqq d \Rightarrow |x + \zeta| \leqq B$.

そこで，$\zeta(t) \equiv (\xi_i(t), \eta_i(t)) \equiv x(t) - x = (q_i(t) - q_i, p_i(t) - p_i)$

とおくと，方程式 (5) は次の方程式に同値

$$(6)\begin{cases} \dfrac{d\xi_i(t)}{dt} = p_i + \eta_i(t) \\ \dfrac{d\eta_i(t)}{dt} = \displaystyle\sum_{j:j\neq i} F(q_i + \xi_i(t) - q_j - \xi_j(t)) \\ (\xi_i(0), \eta_i(0)) = (0, 0) \qquad \|\zeta(t)\|_x : \ t\text{に関し局所有界} \end{cases}$$

$\zeta = (\xi_i, \eta_i)$ に対し

$A_x(\zeta) \equiv \left(p_i + \eta_i ,\ \sum_{j:j \neq i} F(q_i + \xi_i - q_j - \xi_j) \right)$ とおくと, (6) は

$$
(7) \quad \begin{cases} \dfrac{d\zeta(t)}{dt} = A_x(\zeta) \\ \zeta(0) = 0 , \quad \|\zeta(t)\|_x : t \text{ に関し局所有界} \end{cases}
$$

となる。

2°. Lemma

(i) $\exists C > 0,\ \exists D > 0 \quad \|A_x(\zeta)\|_x \leqq C + D \|\zeta\|_x \log_+(\|\zeta\|_x)$

$$\forall \zeta \in \mathcal{Y}_x$$

(ii) $\forall d > 0$ に対し, 次の条件をみたす $B > 0$ が存在.

$\forall \alpha > 1,\ \exists m_0 > 0;\ \forall m \geqq m_0,\ \forall \zeta\ \forall \zeta' \in \mathcal{Y}_x,\ \|\zeta\|_x \leqq d,\ \|\zeta'\|_x \leqq d$

$$\|A_x(\zeta) - A_x(\zeta')\|_{x,m} \leqq B \log_+(m) \|\zeta - \zeta'\|_{x,\alpha m}$$

ここで: $\{\|\ \|_{x,m}\}$ は $\mathcal{Y}_x$ 上の semi-norm

$$\|\zeta\|_{x,m} \equiv \sup_i \frac{|\xi_i| \vee |\eta_i|}{\log_+(q_i)}$$

3°. 上の Lemma を用いれば, 逐次近似解の $\{\|\ \|_{x,m}\}$ による収束が示せて, (6)の解が唯一つ存在する。

次に $[\mathcal{X}_0]$ を full measure にするような $[\mathcal{X}]$ の prob. measure の判定法を述べる

ρ : prob. measure on $[\mathcal{X}]$ $\qquad V \subset R \qquad \pi_V : [\mathcal{X}] \to [\mathcal{X}](V)$

$\rho_V \equiv \pi_V \circ \rho$: prob. measure on $[\mathcal{X}](V)$ $\qquad x \mapsto \pi_V x$

$x = (q_i, p_i) \qquad \pi_V x = \{(q_i, p_i) : q_i \in V\}$

Def. ρ : prob. measure on $[\mathscr{X}]$ が β-Maxwellian $(\beta>0)$

$\Longleftrightarrow$

$^\forall V \subset R$ (finite interval) に対し、ρ_V を $(V\times R)^n/\sim$ 上で考えると、$\exists \hat{\rho}_V^n$; V^n 上の置換不変な measure.

$$d\rho_V(q_1,p_1;\cdots;q_n,p_n) = d\hat{\rho}_V^n(q_1,\cdots,q_n)\exp\left(-\frac{\beta}{2}\sum_{i=1}^n p_i^2\right)dp_1\cdots dp_n$$

定理.2

ρ : prob. measure on $[\mathscr{X}]$ が β-Maxwellian $(\exists\beta>0)$ であって、次の条件(*)をみたす時、$\rho([\mathscr{X}_0])=1$ が成立つ。

$$(*)\left(\begin{array}{l} \exists\lambda>0\ ;\ \forall\alpha<\forall\beta \\ \quad \int_{[\mathscr{X}]} d\rho(x)\, N_{(\alpha,\beta)}(x)\left(N_{(\alpha,\beta)}(x)-1\right)\cdots\left(N_{(\alpha,\beta)}(x)-n\right) \\ \quad \leq [\lambda(\beta-\alpha)]^{n+1} \quad \text{for } \forall n>0,\ \text{integer}. \end{array}\right.$$

limiting Gibbs ensemble について、次のことは知られている。

(1). $\mu<0$; β: 十分大 $\Rightarrow$ limiting Gibbs ensemble は唯1つ存在し、定理.2 の条件が成立つ。

(2). $\Phi\geqq 0 \Rightarrow \forall\beta>0\ \ \forall\mu\in R$ に対する全ての limiting Gibbs ensemble に対して、定理2の条件が成立つ。

但し、(1)で、V 上の Gibbs ensemble が存在するために、Φ が stable potential $\left(\underset{\text{def}}{\Longleftrightarrow} \exists B\ ;\ \forall n\ \forall(q_1,\cdots q_n)\ \sum_{i\neq j}\Phi(q_i-q_j)\geqq -Bn\right)$ を仮定しなければならない。

定理 3

上の (1). (2) のいずれかの中から、かってに選んだ limiting Gibbs ensemble を $\rho_{(\beta, \mu, H)}$ とすると、$\rho_{(\beta, \mu, H)}$ は、定理 1 で構成された力学系に対する不変測度になる。

定理 3 の証明は、§. 1 の (2) (periodic system) については Gibbs ensemble が不変測度になることは既にわかっているので、periodic system で近似できれば、証明できる。

[1]. O. Lanford 「The classical mechanics of one dimensional systems of infinite many particles」 I Comm. Math. Phys. 9. (1968)
II 〃 , 11 (1968)

[2] De Pazzis, 「Ergodic properties of a semi-infinite hard rod system.」 Comm. Math. Phys 22 (1971)

[3] Ya. G. Sinai – K. Volkovyskii., Fun. Anal. and Appl 5 (1971)

[4] Ya. G. Sinai Teor. i mat. fizika. 11 (2) (1972)

ここで述べた問題も含めて、Ergodic theory の秀れた総合報告が、(Sinai, Lanford 及び Ruelle による) Acta Physica Austriaca, Suppl. X pp. 575 ~ 639. (1973) にある。